



TITLE:

複素相空間カオスによるトンネリング機構((3)化学反応、トンネル現象における半古典理論,京大基研短期研究会「量子カオス:理論と実験の現状」,研究会報告)

AUTHOR(S):

大西, 孝明

CITATION:

大西, 孝明. 複素相空間カオスによるトンネリング機構((3)化学反応、トンネル現象における半古典理論,京大基研短期研究会「量子カオス:理論と実験の現状」,研究会報告). 物性研究 2003, 80(1): 116-120

ISSUE DATE:

2003-04-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/97522>

RIGHT:

複素相空間カオスによるトンネリング機構

東京都立大学 理学研究科 大西孝明¹

トンネリングの機構を半古典的観点から理解するさいの、複素相空間カオスの果たす重要な役割について報告する。モデルとして、エネルギー障壁トンネリングを実現する散乱系を考え、波動関数をトンネル軌道(複素古典軌道)を用いて再現した。波動関数を再現するにあたり、実効的に機能する記号力学を複素相空間において構成した。そして各トンネル軌道の波動関数への寄与の大きさを、軌道に割り振られた記号列から見積もった。その結果、膨大な数のトンネル軌道の個々が複素相空間で示す挙動が明らかとなり、またその中から重要な軌道を系統的に選び出すことが可能となった。

1 Introduction

量子力学を特徴付ける、古典力学にはない性質として粒子・波動の二重性がある。とくに後者がその機構を担う現象としてトンネリングがある。逆説的ではあるがこの現象を古典力学の粒子描像に基づいて理解すること—特に系の古典力学が非可積分な場合に—が本稿の目的である。

化学反応では興味ある反応過程に対して、その始状態と終状態を結ぶ古典力学的過程が必ずしも存在するとは限らない。このような反応過程はトンネリングにより記述される。トンネリングが関与する場合でも、インスタント軌道に代表されるように物理量を複素数にまで拡張した古典力学を考えれば、始状態と終状態を結ぶ古典軌道を見出すことが再び可能となり、波動関数(あるいはS行列)への各古典軌道の寄与の大きさは $\sim \exp(-\text{Im} S/\hbar)$ (ここに $\text{Im} S$ は軌道の作用虚部)で見積もられる。この複素化された古典力学を用いることにより、実効的な自由度が低い場合(1自由度)のトンネリングは精度よく説明されている[1]。ここに述べた方法は複素半古典法と呼ばれるものであり、系の実効的な自由度が上がって古典力学にカオスが現れた状況下においても有効に機能することが、様々なモデルへの適用例からわかってきた[2, 3, 4]。しかしそれと同時に、複素半古典法を遂行する上において現れる、非可積分系ゆえの困難もまた浮き彫りになってきた。それは指数関数的に増加するトンネル軌道(複素古典軌道)を選別することである。

以下の§2ではまず非可積分系のトンネリングに関して、半古典的解析からこれまでに得られている結果をおおまかに振り返る。そして非可積分系において必ず現れる難題—膨大な数のトンネル軌道の中で最も重要なものをいかに選び出すか—について考える。§3で、その難題を解決すべくあるモデルに関して我々のおこなった半古典的解析の結果について報告する。最後に§4でまとめを述べる。なお、本稿では実数の相空間、複素数の相空間という言葉の代わりにそれぞれ実領域、複素領域という言葉を使うこともある。

¹E-mail: t.onishi@comp.metro-u.ac.jp

2 非可積分系におけるトンネリング

実数の相空間において、古典力学では遷移不可能な 2 つの領域間の大部分がカオスの運動によって占められている場合、その領域間の tunneling rate は系が可積分である場合に比べて極めて大きくなることが知られている。この現象は、カオスの運動の領域に確率密度の大部分を持つような基底がトンネル輸送を仲介することにより説明されるので、chaos-assisted tunneling と呼ばれている [5]。

しかしたとえわずかな摂動によって非可積分系となった場合でも、すなわちカオスの運動の領域が規則的運動の領域 (トーラス領域) に比べて十分小さい場合でも、tunneling rate が格段に増幅されることがある [6]。この場合、摂動前のトーラスの回転周期と摂動周期との共鳴によって出現する共鳴トーラスがその増幅の機構を担っていることが古典・量子の両摂動論を組み合わせることで説明されている [6]。これらの研究は、古典軌道の概念をトンネリングの計算に直接用いることはしないものの、古典力学の非可積分性がトンネリングに大きな影響を及ぼすことを明らかにしている。

一方、複素半古典法の立場からは、非可積分系のトンネリング機構については以下のことが明らかになっている [2, 3, 4]。時間発展する波動関数に対して寄与するトンネル軌道の数、系が非可積分であることを反映して、時間と共に指数関数的に増大する。また、各軌道が担う半古典的成分波の干渉により、波動関数には極めて複雑な構造が現れる。そしてトンネル軌道および波動関数の持つこれらの性質は、トンネリングを実現する障壁の種類 (エネルギー的障壁または動的障壁) によらない。

しかし上述のトンネル軌道の指数関数的増加は、複素半古典法を一般の非可積分系で遂行する際の非常に大きな制約となる。どのようなトンネル軌道が重要な寄与をもたらすか ($|\text{Im } S|$ が小さくなるか) を、系のもつ特徴、例えばポテンシャルの形状から特定できる場合もある [7]。しかしその様な特定の仕方が可能であるとは一般には期待できない。従って全てのトンネル軌道の中から重要なものを系統的に見出す一般的な手段をいかに提供するかが重要な問題となってくる。

最近、複素古典力学の研究が盛んな Hénon 写像を用いることにより、トンネル軌道の集合 (より正確には無限時間有界にとどまり続ける複素軌道でかつ無限時間にわたる作用積分の虚部が絶対収束するものの集合) が Julia 集合と呼ばれる、複素相空間内のカオス軌道全体の集合の中に極めて “豊富に” 存在することが示された [8]。この結果はその一般性を信じるならば、個別のトンネル軌道を指定することは、まさに個別のカオス軌道を指定することに他ならないことを示している。従ってトンネル軌道の指数関数的増加の背景が明らかにされたとともに、全てのトンネル軌道の中から重要なものを系統的に見出すことの困難さもまた浮き彫りになったわけである。

以下ではあるモデルを立て、この問題の解決を試みる。我々は、カオス的な運動を記述するための一般的な方法である記号力学を用いることによって、トンネル軌道を記述することを考える。その結果として、各トンネル軌道に割り振られた記号列から作用の虚部を見積もり、重要なトンネル軌道であるかどうかを記号列のみから判断できるようにする。ただし頁数の都合上、議論の詳細については文献 [9] に譲らせていただく。

3 実効的な記号力学の構成と作用虚部の見積もり

以下のハミルトニアンで記述される散乱系を考える。ただし k, γ は正実数パラメータである。

$$\mathcal{H}(q, p, t) = T(p) + V(q) \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(t - n), \quad (1)$$

$$T(p) = p^2/2, \quad V(q) = k \exp(-\gamma q^2), \quad (2)$$

上記の系では、どのような k, γ の値に対しても、実数の相空間にはカオスが現れないことがわかっていて (例えば実数値の周期点は常に不動点 $(q, p) = (0, 0)$ のみである)。それに関わらず、図 1(a) に見るように波動関数は複雑な形状を持つ。このことは系 (1) の複素相空間にカオスが存在していることの反映であることが、以下の記号力学を通した解析から明らかとなった。

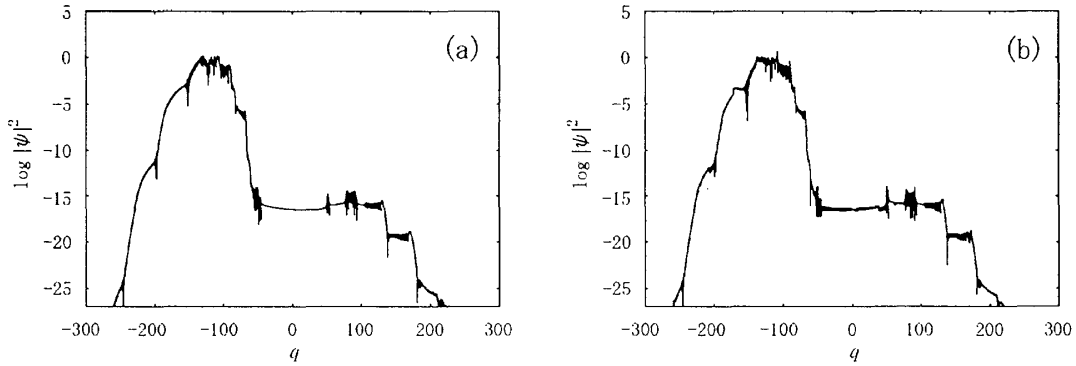


図 1: $q < 0$ から入射した波束の 10 ステップ後の波動関数を (a) 量子力学 および (b) 複素半古典法により計算したもの。波束の重心 ($q \approx -120$) はすでに原点付近の障壁で反射している。

まず軌道の振る舞いを記号化する。記号化のためには通常、相空間を複数の領域に分割し、各領域に対して 1 つの記号を割り振る。こうすることで各軌道の相空間における遍歴が記号列で表されるわけである。任意の記号列に対して高々 1 つのカオス軌道が対応するような相空間の分割は生成分割と呼ばれる [10]。系 (1) に対して我々が定義した実効的な生成分割を図 2(左) に示す。分割された各領域の境界は以下のように与えられる。ただし $V'(q) \equiv \partial V(q)/\partial q$ である。

$$\{(q, p) \in \mathbf{C}^2 \mid \arg(-V'(q)) = (-2\nu xy + (3x + 1)y/2)\pi\} \quad (x, y \in \{1, -1\}, \nu \in \mathbf{N}). \quad (3)$$

分割の各領域は整数の組 (x, y, ν) によって $U(x, y, \nu)$ と指定される。この分割により、各トンネル軌道は以下の記号列によって指定される：

$$a_0 \ a_1 \ a_2 \ a_3 \ \cdots \quad (a_j = (x_j, y_j, \nu_j), \ j \geq 0). \quad (4)$$

ただし a_j は j ステップ目に軌道が領域 $U(a_j)$ を通ることを表し、 $a_j = (0, 0, 0)$ の場合は軌道が図 2(左) の $U(0, 0, 0)$ を通ることを表す。記号列とトンネル軌道との対応を図 2(右) に示す。

次に記号列から、対応するトンネル軌道の作用虚部を見積もる。記号列として (4) が与えられたとき、対応するトンネル軌道が得る作用虚部は以下のように見積もられる：

$$\sum_{j=1}^{+\infty} \text{Im} [T(p_{j-1}) - V(q_j)] \approx \frac{\pi}{\gamma} \sum_{j=1}^{+\infty} (x_j \nu_j^{1/2} - x_{j-1} \nu_{j-1}^{1/2})(y_j \nu_j^{1/2} - y_{j-1} \nu_{j-1}^{1/2}). \quad (5)$$

ただし q_j, p_j は j ステップ目の位置と運動量である. 式 (5) から, 次のような記号列がもっとも小さい作用虚部を与える, すなわちもっとも重要なトンネル軌道を与えることが導かれる.

$$O O O \dots, \text{ または } b b \dots b O O O \dots. \quad (6)$$

ここに $O \equiv (0, 0, 0)$ であり, $b = (1, 1, 1)$ または $(-1, -1, 1)$ である. 図 1(b) の波動関数は記号列 (6) に対応するトンネル軌道のみを用いて再現したものである. 以上より, 重要なトンネル軌道を記号列から選び出すことができた. 我々のアプローチを他の非可積分系に適用する場合, その成否は実効的な記号力学の構成にかかっており, 複素相空間構造の深い理解が不可欠となる.

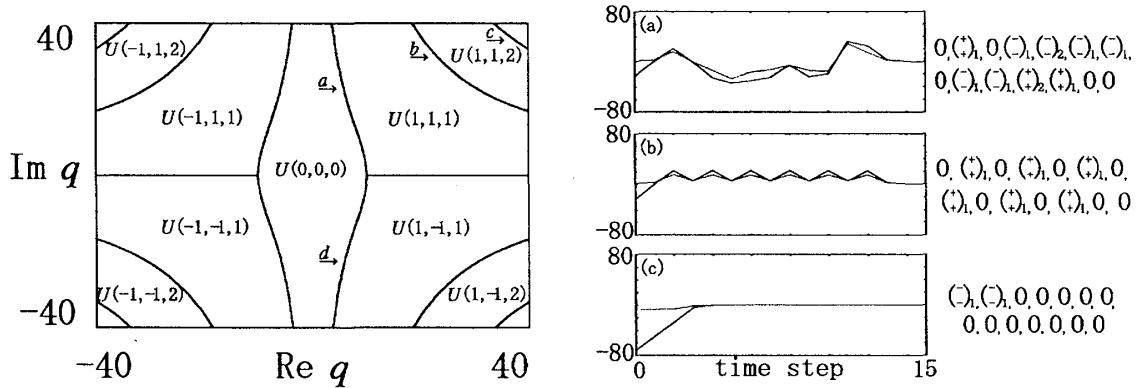


図 2: (左) 相空間の分割の q 平面による断面. 曲線 a, b, c, d は分割の境界であり, 各々 $(x, y, \nu) = (1, 1, 1), (1, 1, 2), (1, 1, 3), (1, -1, 1)$ で指定される. $U(x, y, \nu)$ は分割の各領域を表す. x, y は各々 $\text{Re } q, \text{Im } q$ の符号に対応し, ν は原点からの距離に対応する. (右) トンネル軌道と記号列との対応. 実線, 破線は各々 $\text{Re } q, \text{Im } q$ を表す. 記号 (x, y, ν) は $(x, y)_\nu$ で, x, y の値 $+1, -1$ は $+, -$ で表してある. 各記号列は, 以降に続く $O O O \dots$ の部分を省略してある. 図 (c) は記号列 (6) に対応するトンネル軌道の典型的な運動—実領域へ直行する運動—を表す.

最後に, 系 (1) のカオスの発生機構について考察することで, 複素領域の理解の必要性を強調しておく. 数値計算の限りでは, 我々の系はどのような $k, \gamma > 0$ に対しても, 複素領域にカオスが存在している. 我々の系のように実領域での力場の大きさ $|V'(q)|$ に上限がある場合, 複素領域では Liouville の定理から, $V'(q)$ は q 平面上で特異点を持つか, でなければ無限遠方で発散する (我々の系は後者). すなわち, 実領域で微小な力場は逆に複素領域では極めて大きくならなければならない. このことは, たとえ実領域にカオスが現れなくとも, 十分深い複素領域では軌道が不安定となってカオス的に振る舞う可能性があることを示している.

また離散時間系を, 可積分な連続時間系を差分化したものとする場合, 我々の系ではカオス軌道 (原点に関するホモクリニック軌道) が連続時間系のある特徴的な軌道—有限時間で $|\text{Im } q|$ が発散する軌道—の近傍に発生していることが観察される [9]. この特徴的な軌道の近傍に初期値をもつ離散時間系の軌道は短時間で複素領域深くに到達し, そこでの極めて大きな力場によって軌道の不安定性が増大し, あるものはカオス的に振る舞うことが観察される. 1 変数の複素力学系では, カオスの発生原因として類似のメカニズムがあることが知られており [12], 我々の系をはじめとする多変数の力学系への拡張は重要な課題である.

4 まとめ

エネルギー障壁トンネリングのモデルについて, 実効的な記号力学を用いた半古典的解析から, 波動関数に重要なトンネル軌道を系統的に選び出すことが可能となった. また相空間をどのように運動するトンネル軌道が重要であるのかが明らかとなった. カオス軌道の集合 (Julia 集合) とトンネル軌道の集合との密接な関係は Hénon 写像 [8] だけでなく我々の系でも確認され, 他の非可積分系でも広く見られるものと期待される. よって両集合の密接な関係に基づく我々のアプローチ, すなわち実効的な記号力学によるトンネル軌道の記述, および記号列からの作用虚部の評価, は他の非可積分系のトンネリングの解析に対しても一つの有用な手段となるだろう. そしてその適用に際しては, 複素相空間構造の深い理解が欠かせない. Chaos-assisted tunneling に代表される, 実領域のカオスに完全に立脚したトンネリング機構の解釈をも包括するような半古典的理論の構築が望まれる.

なお本稿は首藤啓氏 (都立大理), 池田研介氏 (立命館理工), 高橋公也氏 (九工大情報) との共同研究をもとに書かれたものであることを付記します.

参考文献

- [1] W. H. Miller and T. F. George, **56** (1972) 5668;
- [2] A. Shudo and K. S. Ikeda, *Physica D* **115** (1998) 234; *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **139** (2000), 246.
- [3] K. Takahashi and K. S. Ikeda, *Found. Phys.* **31** (2001) 177.
- [4] T. Onishi, A. Shudo, K. S. Ikeda, and K. Takahashi, *Phys. Rev. E* **64** (2001), 025201.
- [5] O. Bohigas, S. Tomsovic and D. Ullmo, *Phys. Rep.* **223**, 43 (1993); S. Tomsovic and D. Ullmo, *Phys. Rev E* **50** 145 (1994); S. D. Frischat and E. Doron, *Phys. Rev. E* **57** (1998) 1421.
- [6] O. Brodier, P. Schlagheck, and D. Ullmo, *Phys. Rev. Lett.* **87** (2001) 064101-1; arXiv:nlin.CD/0205054.
- [7] S. C. Creagh and N. D. Whelan, *Phys. Rev. Lett.* **82** (1999) 5237.
- [8] A. Shudo, Y. Ishii, and K. S. Ikeda, *J. Phys. A* **35** (2002) L225.
- [9] T. Onishi, A. Shudo, K. S. Ikeda, and K. Takahashi, to be submitted.
- [10] A. Katok and B. Hasselblatt *Introduction to the Modern Theory of Dynamical Systems* (Cambridge, 1999).
- [11] R. L. Devaney and M. Krych, *Ergod. Th. & Dynam. Sys.* **4** (1984), 35.
- [12] H. Benzinger, *Proc. Amer. Math. Soc.* **117** (1993) 939.